



**Programa de estudios de experiencia educativa**

**1.-Área académica**

Área Académica Técnica

**2.-Programa educativo**

Química Industrial

**3.-Campus**

Orizaba

**4.-Dependencia/Entidad**

Facultad de Ciencias Químicas

5.-Código	6.-Nombre de la experiencia educativa	7.-Área de formación	
		Principal	Secundaria
QICQ 18020	<i>Química supramolecular y Modelado Molecular</i>	T	Ninguna

**8.-Valores de la experiencia educativa**

Créditos	Teoría	Práctica	Total de horas	Equivalencia(s)
6	2	2	60	Ninguna

**9.-Modalidad**

**10.Oportunidades de evaluación**

Curso-Taller	ABGHJK=Todas
--------------	--------------

**11.-Requisitos**

Prerrequisitos	Correquisitos
Ninguno	Ninguno

**12.-Características del proceso de enseñanza aprendizaje**

Individual/Grupal	Máximo	Mínimo
Grupal	40	10



**13.-Agrupación natural de la experiencia educativa**

Academia de Ciencias químicas	No aplica
-------------------------------	-----------

**14.-Proyecto integrador**

**15.-Fecha**

Elaboración	Modificación	Aprobación
Enero 2020	---	Junio 2020

**16.-Nombre de los académicos que participaron**

Dra. Sharon Rosete Luna, Dr. Rodolfo Peña Rodríguez, Dr. Raúl Colorado Peralta, Dra. Esmeralda Sánchez Pavón
--

**17.-Perfil docente**

Ingeniería o Licenciatura en áreas afines a la Química, preferentemente con postgrado afín al área de conocimiento.
---

**18.-Espacio**

Intrafacultades	Multidisciplinaria
-----------------	--------------------

**19.-Relación disciplinaria**

**20.-Descripción**

Esta experiencia educativa se localiza en el AFD en el paquete de química, es un curso-taller de 2 horas teóricas y 2 horas prácticas con un total de 6 créditos. Su propósito es que el estudiante aplique cálculos computacionales para predecir propiedades químicas de las moléculas, es indispensable ya que al alumno le permitirá dar solución a los problemas experimentales aplicando las leyes que rigen la mecánica cuántica y mecánica molecular en las que se proponen estrategias metodológicas basadas en la implementación de habilidades de razonamiento crítico y pensamiento científico, búsqueda de información, trabajo en equipo. Por lo tanto, el desempeño de la unidad de competencia se evidencia en forma integral tomando en cuenta la discusión de artículos de divulgación científica, tareas, exámenes y un proyecto de investigación.
---

**21.-Justificación**

La Química supramolecular y Modelado Molecular permitirá al Químico industrial, aplicar cálculos computacionales idóneos, basados en la mecánica cuántica y mecánica molecular, para predecir las propiedades químicas de las moléculas que son de interés en el área de la industria farmoquímica, química, alimentos entre otras, utilizando metodologías computacionales. Estos conocimientos le permitirán al estudiante proponer alternativas sintéticas, así como, interpretar de manera teórica las interacción que existen entre los
--



diversos tipos de moléculas provocando que pueda dar soluciones en las diferentes problemáticas en el área de la química, con una actitud de responsabilidad y honestidad.

## 22.-Unidad de competencia

El estudiante aplica los conocimientos de química computacional para determinar la optimización molecular de especies químicas, sitios electrofílicos y nucleofílicos, determinación de espectros teóricos de IR, UV/Vis, RMN  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ , utilizando diferentes niveles de teoría, basados en la mecánica cuántica y mecánica molecular, con el fin de entender las propiedades moleculares, que darán solución a necesidades de la industria farmoquímica con responsabilidad social, objetividad y honestidad.

## 23.-Articulación de los ejes

Los alumnos reflexionan en grupo en un marco de orden y respeto mutuo sobre el modelado molecular y la química supramolecular en donde aplica conceptos básicos de química computacional reflexionando en las actividades de aplicación práctica en equipo, elaboran un razonamiento crítico en la resolución de exámenes. Finalmente discuten en grupo su propuesta.

## 24.-Saberes

Teóricos	Heurísticos	Axiológicos
<p><b>Química Supramolecular</b>                      Fundamentos                      -Anfitrión-huésped                      -Preorganización y complementariedad.                      -Selectividad termodinámica y cinética.                      -Interacciones intermoleculares                      -Reconocimiento molecular de</p> <p>A. Cationes                      B. Aniones                      C. Moléculas neutras                      -Autoensamblaje y efecto plantilla</p> <p><b>Introducción a la Química Computacional</b>                      Fundamentos:                      -Mecánica molecular                      -Cálculos semiempíricos                      -Cálculos <i>Ab initio</i></p>	<p>Entiende conceptos básicos de la química supramolecular, conoce el modelo Anfitrión-huésped, identifica la importancia del reconocimiento molecular en los sistemas químicos, así como la construcción de los ensamblajes supramoleculares.</p> <p>Comprende la diferencia de los métodos computacionales para optimización molecular basada en la mecánica molecular y la mecánica cuántica.</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Responsabilidad en la entrega y realización de las evidencias de desempeño</li> <li>• Solidaridad con sus compañeros y profesor al realizar actividades</li> <li>• Respeto a los comentarios de sus compañeros y del profesor</li> <li>• Honestidad en la realización de sus evidencias de desempeño</li> <li>• Objetividad al realizar los problemas y/o ejercicios durante y fuera de clase</li> </ul>



<p>-Teoría de los funcionales de la densidad (DFT)</p> <p><b>Modelado Molecular</b>                  Conceptos básicos                  -Teoría del orbital molecular                  -Geometría molecular                  -Optimización y energía                  -Reactividad química                  -Espectros de IR, UV/vis, RMN <sup>1</sup>H y <sup>13</sup>C                  -Propiedades químicas de las sustancias.                  -Ejercicios de aplicación.</p> <p><b>Diseño computacional</b>                  -Base de datos: Biblioteca de compuestos químicos                  -Espacio químico                  -Relaciones estructura-actividad                  -Acoplamiento molecular automatizado.                  -Ejemplos</p>	<p>Comprende la importancia y principales aplicaciones del modelado molecular asistida por computadora para ayudar a resolver problemas químicos como son la disposición espacial de los átomos en las moléculas, las propiedades de las moléculas y el isómero más favorecido, los sitios electrofílicos y nucleofílicos</p> <p>Comprende y analiza los conceptos básicos de quimioinformática, siendo capaces de manejar e interpretar técnicas computacionales asociadas en el descubrimiento, diseño y desarrollo de compuestos bioactivos.</p>	
--	---	--

## 25.-Estrategias metodológicas

De aprendizaje	De enseñanza
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Exposición con apoyo tecnológico variado</li> <li>• Investigación documental</li> <li>• Resumen</li> <li>• Aprendizaje basado en problemas</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Atención a dudas y comentarios</li> <li>• Planteamiento de preguntas guía.</li> <li>• Preguntas detonadoras.</li> <li>• Recuperación de saberes previos.</li> <li>• Lectura comentada.</li> </ul>

## 26.-Apoyos educativos

Materiales didácticos	Recursos didácticos
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Libro</li> <li>• Software</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Proyector/cañón</li> <li>• Pintarron</li> </ul>



<ul style="list-style-type: none"> <li>• Fotocopias</li> <li>• Simulaciones interactivas</li> <li>• Páginas web</li> <li>• Presentaciones</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Computadoras</li> </ul>
--	--

## 27.-Evaluación del desempeño

Evidencia(s) de desempeño	Criterios de desempeño	Ámbito(s) de aplicación	Porcentaje
Discusión de artículos	Comprensión y exposición	Salón	20%
Tareas	Entrega en tiempo y forma	Extraclase	20%
Exámenes	Responder correctamente	salón	40%
Proyecto de investigación	Cumplir con los requisitos establecidos	Salón	20%

## 28.-Acreditación

Para acreditar esta EE el estudiante deberá haber presentado con idoneidad y pertinencia cada evidencia de desempeño, es decir, que en cada una de ellas haya obtenido cuando menos el 60%, además de cumplir el porcentaje de asistencia establecido en el estatuto de alumnos 2008.

## 29.-Fuentes de información

Básicas
<ul style="list-style-type: none"> <li>• A. R. Leach, (2001), <i>Molecular Modelling Principle and applications</i>, Ed. Prentice Hall.</li> <li>• E. Lewars, (2016), <i>Computational Chemistry, Introduction to the theory and applications of molecular and Quantum Mechanics</i>, Springer, 3a. edition.</li> <li>• F. Jensen, Ed. Wiley, (2017), <i>Introduction of Computational Chemistry</i>, 3a. edition.</li> <li>• H. G. Schneider, (2012), <i>Applications of Supramolecular Chemistry</i>, CRC Press.</li> <li>• J. M. Lehn, (1995), <i>Supramolecular Chemistry-Concepts and Perspectives</i>, VCH, Weinheim, ch. 9.</li> <li>• J. W. Steed, J. L. Atwood, J. Wiley &amp; Sons., (2009), <i>Supramolecular Chemistry</i> England, 2a. edition.</li> <li>• W. J. Hehre, (2013), <i>A Guide to Molecular Mechanics and Quantum Chemical Calculations</i>. Ed. Wavefunction. 1e. edition.</li> </ul>
Complementarias
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Biblioteca virtual UV</li> </ul>



- Chen, W.L. (2006) *Chemoinformatics: Past, present, and future*. J. Chem. Inf. Model. 46:2230-2255.
- J. Gasteiger, (2016), *Chemoinformatics: Achievements and Challenges, a Personal View*, Molecules, 21:151.
- K. Jean and Luc Fauchère, (1989), *QSAR: Quantitative structure-activity relationships in drug design*.
- Satya Prakash Gupta, (2006), *QSAR and molecular modeling studies in heterocyclic drugs*, Ed Springer-Verlag.